УДК 531.19

Б. П. Антонюк – старший викладач кафедри вищої математики та інформатики Волинського національного університету імені Лесі Українки

Представлення розв'язків задачі Коші для ієрархії ББГКІ несиметричної системи частинки в термостаті у вигляді розкладу за кумулянтами

Роботу виконано на кафедрі вищої математики та інформатики ВНУ ім. Лесі Українки

Побудовано кумулянтне представлення розв'язків задачі Коші ланцюжка рівнянь Боголюбова (ієрархії ББГКІ) несиметричної системи частинки в термостаті. Досліджено збіжність побудованих розкладів у відповідних функціональних просторах.

Ключові слова: ієрархія ББГКІ, несиметричні системи частинок, нерівноважний кластерний розклад, кумулянт (семиінваріант).

Антонюк Б. П. Представление решений задачи Коши для иерархии ББГКИ несимметричной системы частицы в термостате в виде расписания за кумулянтами. Построено кумулянтное представление решений задачи Коши для цепочки уравнений Боголюбова (иерархии ББГКИ) несимметрической системы частицы в термостате. Исследовано сходимость построенных разложений в соответствующих функциональных пространствах.

Ключевые слова: иерархия ББГКИ, несимметричные системы частиц, неравновесное кластерное разложение, кумулянт (семиинвариант).

Antonuk B.P. Representation of solutions of the Cauchy Problem for the BBGKY Hierarchy of Nonsym-Metrical System of Particle in Thermostat as a Form of Expansion for Cumulants. We construct the cumulant representation of the Cauchy problem for the Bogolyubov chain of equations (BBGKY hierarchy) of nonsymmetrical system of particles in thermostat. A convergence of the constructed expansions is invertigated in the corresponding functional spaces.

Key words: BBGKY hierarchy, nonsymmetrical systems of particles, nonequilibrium cluster expansion, cumulant (semi-invariant).

Постановка наукової проблеми та її значення. Одним з основних завдань сучасної математичної фізики є вивчення властивостей і поведінки макроскопічних тіл, тобто систем, які складаються з нескінченної кількості однакових мікрочастинок (електронів, атомів, молекул тощо), на основі властивостей та законів руху цих мікрочастинок. Рух окремих мікрочастинок може підпорядковуватися законам класичної або квантової механіки [1]. У класичній механіці стан макроскопічної системи визначається набором координат q й імпульсів p, усіх її частинок. Стан системи відображається точкою у фазовому просторі, а зміна стану – рухом цієї точки вздовж фазової траєкторії $(q = q(t), p = p(t))$. На відміну від механічних, статистичні закономірності не залежать від початкових умов, у яких перебувала система; вони втрачають будь-який зміст при переході до системи зі скінченним числом ступенів вільності і не зводяться до механічних закономірностей. У зв'язку із цим поведінка системи описується методами теорії імовірностей.

Матеріали і методи. Для створення моделей поведінки макроскопічних тіл широко використовують математичні методи, серед яких важливе значення має ланцюжок рівнянь Боголюбова – нескінченна система інтегро-диференціальних рівнянь (ієрархія ББГКІ). Відомо, що всі можливі стани систем частинок повністю моделюються нескінченною послідовністю частинкових функцій розподілу, що задовольняють рівняння Боголюбова [5; 6]. Ієрархія ББГКІ є фундаментальною також і в тому сенсі, що, внаслідок граничних переходів, із неї можна вивести феноменологічні рівняння руху статистичних систем, наприклад, кінетичні рівняння, рівняння гідродинаміки, рівняння дифузії.

Побудуємо кумулянтне представлення розв'язків задачі Коші ланцюжка рівнянь Боголюбова (ієрархії ББГКІ) одномірної системи виділеної частинки в термостаті. Зауважимо, що в цій роботі досліджується несиметрична багаточастинкова система, тобто система з несиметричним гамільтоніаном відносно перестановок аргументів, що характеризують кожну із частинок. Розв'язок задачі Коші для цього рівняння визначається розкладом за групами (кластерами) зростаючого числа частинок у формі ряду ітерацій або певного функціонального ряду, методом нерівноважних кластерних розкладів [7]. Структура цих розкладів залежить від типу системи частинок [2].

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. Розглянемо одновимірну систему виділеної частинки в термостаті. Потенціал Φ взаємодії найближчих сусідніх частинок цієї системи має властивості:

$$\Phi(q)=\begin{cases}+\infty & |q|<\sigma;\\ 0 & |q|>R>0;\end{cases}\qquad \Phi\in C^2[\sigma,R].$$

Позначимо $W_{n_1+1+n_2}$ – множину заборонених конфігурацій. Гамільтоніан [4] такої системи має вигляд:

$$H_n=\sum_{i=-n_2}^{n_1}\frac{p_i^2}{2}+\sum_{i=-n_2}^{n_1-1}\Phi(q_i-q_{i+1}),\ \text{де}\ n=n_1+1+n_2.$$

Уведемо послідовність початкових даних:

$$F(0)=\{F_s(0,x_{-s_2},\ldots,x_{s_1})\}_{s=s_1+1+s_2\geq 0},$$

що є подвійною послідовністю s-частинкових функцій розподілу:

$$F_s(0,x_{-s_2},\ldots,x_{-1},x_0,x_1,\ldots,x_{s_1})\quad x_i=(q_i,p_i)\in R^1\times R^1.$$

Для знаходження розв'язку $F(t)=\{F_s(t,x_{-s_2},\ldots,x_{s_1})\}_{s=s_2+1+s_1\geq 0}$ задачі Коші ланцюжка рівнянь Боголюбова виразимо її через функцію Ліувілля:

$$F_{s_2+1+s_1}(t,x_{-s_2},\ldots,x_{s_1})=\left(1+\sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty}\int dx_{-n_2}\ldots dx_{n_1}D_{n_2+1+n_1}\left(t,x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right)\right)^{-1}\times$$

$$\times\sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty}\int_{(R^2)^{n_2+1+n_1}}dx_{-(n_2+s_2)}\ldots dx_{-(s_2+1)}dx_{s_1+1}\ldots dx_{s_1+n_1}D_{n_2+s_2+1+n_1+s_1}\left(t,x_{-(n_2+s_2)},\ldots,x_{n_1+s_1}\right),$$

де $s_1,s_2\geq 0$.

В абстрактному вигляді, використовуючи еволюційний оператор $U_{(n_1,n_2)}$, розв'язок задачі Коші матиме вигляд:

$$\begin{aligned}&F_{s_2+1+s_1}(t,x_{-s_2},\ldots,x_{s_1})=\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n=n_1+n_2}\int_{(R^1\times R^1)^{n_1+n_2}}dx_{-(n_2+s_2)}\ldots dx_{-(s_2+1)}dx_{s_1+1}\ldots dx_{s_1+n_1}\times\\&\times U_{(n_2,n_1)}\left(t,x_{-(n_2+s_2)},\ldots,x_{s_1+n_1}\right)\times F_{s+n}\left(0,x_{-(n_2+s_2)},\ldots,x_{s_1+n_1}\right).\end{aligned}\tag{1}$$

Причому отриманий таким чином розв'язок є коректним, тобто ряди в просторі сумовних функцій збіжні.

Зауважимо, що оператор $U_{(n_2,n_1)}(t)$ виражається через еволюційний оператор рівняння Ліувілля для системи скінченого числа частинок $S\left(-t,x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right)$ таким чином:

$$\begin{aligned}&U_{(n_1,n_2)}\left(t,x_{-(n_2+s_2)},\ldots,x_{-(s_2+1)},x_{-s_2},\ldots,x_{s_1},x_{s_1+1},\ldots,x_{s_1+n_1}\right)=\\&=\sum_{k_1=0}^{\min(1,n_1)}\sum_{k_2=0}^{\min(1,n_2)}(-1)^{k_1+k_2}S_{s+n-k_1-k_2}\left(-t,x_{-(n_2+s_2-k_2)},\ldots,x_{n_1+s_1-k_1}\right),\end{aligned}\tag{2}$$

де $n=n_1+n_2$, $s=s_1+1+s_2$.

Еволюційний оператор при цьому має вигляд:

$$S_n\left(-t,x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right)f\left(x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right)=$$

$$=\begin{cases}f_n\left(X_{-n_2}\left(-t,x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right),\ldots,X_{n_1}\left(-t,x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right)\right) & x\in R^n\times(R^n\setminus W_n);\\ 0, & \left(q_{-n_2},\ldots,q_{n_1}\right)\in W_n,\end{cases}$$

де $X_i\left(-t, x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right)$ – розв'язок початкової задачі для рівнянь Гамільтона системи $n = n_1 + 1 + n_2$ частинок із початковими даними $X_i\left(0, x_{-n_2},\ldots,x_{n_1}\right) = x_i$, $i = -n_2,\ldots n_1$, $S_n(0)$ – одиничний оператор.

Для всіх $n_1 \geq 0$, $n_2 \geq 0$ справедливою є така рівність:

$$S_{s+n}\left(-t, x_{-(n_2+s_2)},\ldots,x_{s_1+n_1}\right) = \\ = \sum_{k_1=0}^{n_1}\sum_{k_2=0}^{n_2} U_{(k_1,k_2)}\left(t, x_{-(k_2+s_2)},\ldots,x_{-(s_2+1)}, x_{-s_2},\ldots,x_{s_1}, x_{s_1+1},\ldots,x_{s_1+k_1}\right), \quad (3)$$

де $n = n_1 + n_2 \geq 0$, $s = s_1 + 1 + s_2$.

Отже, розв'язок початкової задачі для ланцюжка рівнянь Боголюбова визначений рядом (2), якщо еволюційний оператор $S_{s+n}(-t)$, що визначає еволюцію системи з $s + n = s_1 + 1 + s_2 + n_1 + n_2$ частинок, задається розкладом (3).

Співвідношення (3) цілком характеризують оператори $U_{(n_1,n_2)}(t)$ і є частинним випадком кластерного розкладу за кумулянтами.

Уведемо кумулянти еволюційного оператора $S(t)$ системи з $s + n = n_2 + s_2 + 1 + s_1 + n_1$ частинок. Для цього позначимо $\left(x_{-s_2},\ldots,x_{s_1}\right) \equiv Y$, $\left(x_{-(n_2+s_2)},\ldots,x_{s_1+n_1}\right) \equiv X$. Множини X, Y є частково впорядковані. Підмножину Y множини X будемо трактувати як один елемент, подібний до $\left(x_{-(n_2+s_2)},\ldots, x_{-(s_2+1)}, x_{s_1+1},\ldots, x_{s_1+n_1}\right)$, тоді для такої частково впорядкованої множини будемо використовувати позначення X_Y. Позначатимемо $|Y| = s = s_1 + 1 + s_2$ – число елементів множини Y, тому $|X_Y| = n_1 + n_2 + 1$.

Кумулянти $\mathrm{A}_{(n_2+n_1)}(t)$ еволюційного оператора $S_{s+n}(-t)$ визначаються як розв'язки рекурентних співвідношень і мають вигляд: $\mathrm{A}_{(n_2,n_1)}(t, X_Y) = \sum\limits_{P: X_Y = \bigcup_i X_i} (-1)^{|p|-1} \prod\limits_{X_i} (-t, X_i)$,

де $n_1 + n_2 = n \geq 0$, $\sum_P$ – сума по всіх можливих впорядкованих розбиттях частково впорядкованої множини X_Y на $|P|$ непорожніх частково впорядкованих підмножин $X_i \subset X_Y$, що взаємно не перетинаються $X_i \cap X_Y = \varnothing$, а множина Y цілком належить одній із підмножин X_i.

Розв'язок задачі Коші для ланцюжка рівнянь Боголюбова у формі розкладу за кумулянтами визначається формулою:

$$F_{|Y|}(t, Y) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{n = n_1 + n_2 \\ n_1, n_2 \geq 0}} \int\limits_{(R^1 \times R^1)^{n_1+n_2}} d(X \setminus Y) \sum_{P: X_Y = \bigcup_i X_i} (-1)^{|P|-1} \prod_{X_i \subset P} S_{|X_i|}(-t, X_i) \times F_{|X|}(0, X), \quad (4)$$

де $d(X \setminus Y) = dx_{-(n_2+s_2)}\ldots dx_{-(s_2+1)} dx_{s_1+1}\ldots dx_{s_1+n_1}$. Причому дане зображення є еквівалентним зображенню (1).

Позначимо $L_\alpha^1 = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \sum\limits_{\substack{n = n_1 + n_2 \\ n_1, n_2 \geq 0}} \oplus \alpha^{n_1+n_2} L_{n_1+n_2}^1$ банахів простір подвійних послідовностей $f = \left\{f_n(x_{-n_2},\ldots,x_{n_1})\right\}_{n = n_1 + n_2 \geq 0}$ інтегрованих функцій $f_n(x_{-n_2},\ldots,x_{n_1})$, визначених на фазовому просторі $R^n \times (R^n \setminus W_n)$ з нормою

$$\|f\| = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{n = n_1 + n_2 \\ n_1, n_2 \geq 0}} \alpha^{n_1+n_2} \|f_n\|_{L^1_{n_1+n_2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{n = n_1 + n_2 \\ n_1, n_2 \geq 0}} \alpha^{n_1+n_2} \times \int\limits_{(R^1 \times R^1)^{n_1+n_2}} dx_{-n_2}\ldots dx_{n_1} \left| f_{n_1+n_2}(x_{-n_2},\ldots, x_{n_1}) \right|,$$

де $\alpha > 1, L_{\alpha,0} \subset L_\alpha^1$ – підпростір фінітних послідовностей неперервно диференційовних функцій із компактними носіями. Для $f \in L_\alpha^1$ означимо оператори:

$$(a^{+} f)_n(x_{-n_2},...,x_{n_1}) = \int\limits_{(R^1\times R^1)} dx_{n_1+1} f_{n+1}(x_{-n_2},...,x_{n_1},x_{n_1+1}),$$

$$(a^{-} f)_n(x_{-n_2},...,x_{n_1}) = \int\limits_{(R^1\times R^1)} dx_{-(n_2+1)} f_{n+1}(x_{-(n_2+1)},x_{-n_2},...,x_{n_1}).$$

Тоді формула (4) набере вигляду:

$$F(t) = (1-a^{+})^{-1}(1-a^{-})^{-1}\mathrm{A}(t)F(0) = (1-a^{+})^{-1}(1-a^{-})^{-1}\left(1-(1+S(-t))^{-1}\right)F(0).$$

Справедливою є **теорема**:

Якщо $F(0)\in L^1_\alpha$ – подвійна послідовність невід'ємних функцій, тоді за умови, що $\alpha > 2$, для $t \in R^1$ існує єдиний розв'язок задачі Коші для ланцюжка рівнянь Боголюбова несиметричних систем – послідовність $F(t)\in L^1_\alpha$ невід'ємних функцій $F_{s_1+s_2}(t)$, які визначаються розкладами:

$$F_{|Y|}(t,Y) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{n=n_1+n_2 \\ n_1,n_2\geq 0}} \int\limits_{(R^1\times R^1)^{n_1+n_2}} d(X\setminus Y) \sum_{P:X_Y=\bigcup_i X_i} (-1)^{|P|-1} \prod_{X_i\subset P} S_{|X_i|}(-t,X_i)\times F_{|X|}(0,X),$$

або в операторному вигляді:

$$F(t) = (1-a^{+})^{-1}(1-a^{-})^{-1}\mathrm{A}(t)F(0) = (1-a^{+})^{-1}(1-a^{-})^{-1}\left(1-\left(1+S(-t)\right)^{-1}\right)F(0).$$

Причому для $F(0)\in L^1_{\alpha,0}$ – це сильний розв'язок, а для довільних початкових даних – слабкий.

Висновки і перспективи подальших досліджень. Отже, в основі статистичної механіки лежать абстрактні еволюційні рівняння Боголюбова як моделі рівноважних та нерівноважних станів системи. Щоб визначити еволюцію системи, потрібно побудувати для них еволюційний оператор. При цьому виникають складні математичні проблеми, пов'язані з тим, що оператор рівняння Боголюбова необмежений, а функціональний простір містить функції розподілу нескінченних систем. Для вирішення цієї проблеми існує метод термодинамічного граничного переходу, суть якого в тому, що спершу будують розв'язки для скінченних систем у скінченному просторі, а згодом число частинок і об'єм гранично спрямовують до нескінченності, лишивши сталими густину та деякі інші характеристики системи. Розв'язки, отримані термодинамічним переходом, описують нескінченні системи.

Список використаної літератури

1. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике / Н. Н. Боголюбов. – М. : Гостехиздат, 1946. – 119 с.
2. Герасименко В. І. Нерівноважні кластерні розклади несиметричних систем частинок / В. І. Герасименко, М. О. Сташенко // Наук. вісн. ВДУ ім. Лесі Українки. – 2002. – № 4. – С. 5–13.
3. Герасименко В. И. О решениях уравнений Боголюбова для одномерной системы упругих шаров / В. И. Герасименко // Теорет. и мат. физика. – 1992. – Т. 91, № 1. – С. 120–128.
4. Петрина Д. Я. Математические основы классической статистической механики / Д. Я. Петрина, В. И. Герасименко, П. В. Малышев. – Киев : Наук. думка, 1985. – 265 с.
5. Петрина Д. Я. Математические проблемы статистической механики системы упругих шаров / Д. Я. Петрина, В. И. Герасименко // Успехи мат. наук. – 1990. – Т. 45, № 3(273). – С. 135–182.
6. Петрина Д. Я. Математическое описание эволюции состояния бесконечных систем классической статистической механики / Д. Я. Петрина, В. И. Герасименко // Успехи мат. наук. – 1983. – Т. 38, вып. 5. – С. 3–58.
7. Cercignani C. Many-Particle Dynamics and Kinetic Equations / C. Cercignani, V. I. Gerasimenko, D. Ya. Petrina. – Dordrecht : Kluwer Acad. Publ., 1997. – 252 p.

Стаття надійшла до редколегії
08.10.2012 р.